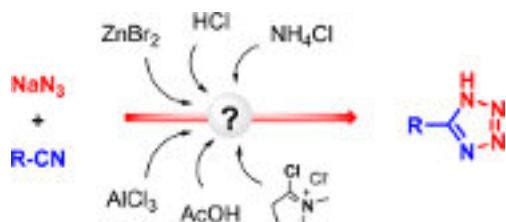


Cálculos realizados en LUSITANIA permiten conocer el catalizador más eficiente para la síntesis de tetrazoles

• Fri, 23/11/2012



La gran importancia de las sustancias conocidas como tetrazoles para la industria farmacéutica y de materiales está dando lugar en los últimos años a grandes esfuerzos en la comunidad científica para encontrar procesos que permitan prepararlos de manera eficiente.

Gracias a la capacidad del [supercomputador LUSITANIA](#) [1], investigadores del [Grupo QUOREX](#) [2] de la [Universidad de Extremadura](#) [3], en colaboración con la [Universidad Karl-Franzens de Graz](#) [4] en Austria, han podido realizar un ambicioso estudio comparando todos los catalizadores conocidos mediante modelos de Química Computacional. Mediante el análisis de los resultados se han determinado la clase de catalizadores que generan los tetrazoles de un modo más eficaz, y al mismo tiempo desarrollar un nuevo método basado en sales de aluminio.

Los excelentes resultados han sido publicados en la prestigiosa revista internacional [The Journal of Organic Chemistry](#) [5], de la [American Chemical Society](#) [6].

Fuente de la publicación:

- [An Experimental and Computational Assessment of Acid-Catalyzed Azide-Nitrile Cycloadditions](#) [7]

Noticias relacionadas:

- [Investigadores extremeños y austriacos utilizan el supercomputador Lusitania para determinar los procesos más eficaces para la síntesis de tetrazoles - GobEx](#) [8]

Source

URL: <https://web.computaex.es/en/noticias/231112-calculos-realizados-lusitania-permiten-conocer-catalizador-eficiente-sintesis-tetraz>

Links

[1] <https://web.computaex.es/cenits/lusitania> [2] <https://web.computaex.es/proyectos/quorex> [3] <http://www.unex.es> [4] <http://www.uni-graz.at/> [5] <http://pubs.acs.org/journal/jocea> [6] <http://portal.acs.org/portal/acs/corg/content> [7] <https://web.computaex.es/enlaces/publicaciones/experimental-and-computational-assessment-acid-catalyzed-azide-nitrile-cycload> [8] <http://gobex.es/salaprensa/view/press/press/detalle.php?hl=es&id=7142>